Karlsruher Institut für Technologie

Institut für Physikalische Chemie
Abteilung für Theoretische Chemie

Seminar über Theoretische Chemie

jeweils donnerstags, 15:15 Uhr, im Seminarraum 408, 4. OG, Geb. 30.44

03.11.11 **Dr. Michael Harding**
Towards highly accurate *ab initio* thermochemistry of larger systems: Benzene

10.11.11 **Dr. Cong Wang**
Analytical evaluations of unlinked exponential-correlated one-center three- and four-electron integrals

17.11.11 **Dr. Michiel van Setten** (INT, Campus Nord)
The *GW* method for quantum chemistry applications:
Theory, implementation, benchmarks

24.11.11[*)] **Dr. Alexander Schug** (Steinbuch Centre for Computing)
14:30 Uhr In-silico protein folding using coarse-grained models

08.12.11 **Tilmann Bodenstein**
Spin-Bahn-Effekte in mehrkernigen Übergangsmetallkomplexen

19.01.12 **Jun.-Prof. Dr. Thomas Kühne** (Universität Mainz)
Quantum chemistry in a glass of water

26.01.12 **Anikó Udvarhelyi** (MPI für medizinische Forschung, Heidelberg)
Photoinduced proton-coupled electron transfer in BLUF photoreceptors.
A CASSCF study.

02.02.12 **Dr. Andrey Yachmenev**
A simple method to improve the accuracy of the RI approximation for two-electron Coulomb integrals

09.02.12 **Anna Hehn**
Calculation of molecular spectra using Fock-space coupled-cluster theory

gez. W. Klopper

***) Bitte die Uhrzeit beachten.**